



**DETEKSI KEMURNIAN AIR ZAMZAM MENGGUNAKAN
METODE SPEKTROFOTOMETRI *FOURIER TRANSFORM*
INFRARED (FTIR) DAN KEMOMETRIK**

SKRIPSI

Oleh

**Kun Rasyida
NIM 102210101054**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS JEMBER
2014**



**DETEKSI KEMURNIAN AIR ZAMZAM MENGGUNAKAN
METODE SPEKTROFOTOMETRI *FOURIER TRANSFORM*
INFRARED (FTIR) DAN KEMOMETRIK**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat
untuk menyelesaikan Program Sarjana Farmasi (S1)
dan mencapai gelar Sarjana Farmasi

oleh

**Kun Rasyida
NIM 102210101054**

**FAKULTAS FARMASI
UNIVERSITAS JEMBER
2014**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Allah SWT yang senantiasa memberikan rahmat dan nikmat yang tak terhingga untuk hambaNya.
2. Rasulullah SAW yang senantiasa menjadi penyemangat bagi penulis agar senantiasa bersemangat dalam menuntut ilmu.
3. Orang tua penulis Bpk. Sholehudin A. Choliq dan Ibu Rukunsih yang selalu memberikan cinta dan kasih sayangnya;
4. Kakak tercinta Kun Sholieha dan Kun Farieha yang selalu menjadi inspirasiku;
5. Prof. Drs. Bambang Kuswandi, M.Sc., Ph.D. selaku Dosen Pembimbing Utama dan Ibu Nia Kristiningrum, S. Farm., Apt., M.Farm selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan bantuan, bimbingan dan perhatian hingga terselesaikannya skripsi ini. Bapak Dian Agung P., S.Farm., M.Farm., Apt. dan Moch. Amrun Hidayat, S.Si., Apt., M.Farm. yang telah meluangkan waktu untuk menguji dan memberikan saran hingga terselesaikannya skripsi ini;
6. Guru-guruku di TK Udayana, SDN 3 Gianyar, SMPN 1 Gianyar dan SMAN 1 Gianyar;
7. Almamater tercinta Fakultas Farmasi Universitas Jember.

MOTO

“Sesungguhnya sesudah kesulitan itu ada kemudahan, Maka apabila kamu telah selesai (dari sesuatu urusan), kerjakanlah dengan sungguh-sungguh (urusan) yang lain, Dan Hanya kepada Tuhanmulah hendaknya kamu berharap.”
(terjemahan Surat *Al-Insyirah* ayat 6-8)^{*}

“Menuntut ilmu karena Allah adalah bukti ketundukkan pada-Nya. Mempelajarinya dari seorang guru adalah ibadah. Melangkah menuju majelisnya adalah pembuka jalan surga. Duduk ditengah kajiannya adalah taman firdaus. Membahasnya adalah bagian dari jihad. Mengajarkannya adalah tasbih. Menyampaikannya kepada orang yang tidak tahu adalah sodaqoh. Mencerulkannya pada orang yang berhak menerimanya adalah qurbah”.
(*Mu'adz Ibn Jabal Radhiyallahu 'Anhu*)

Kesuksesan tak dinilai dari seberapa cepat kau mencapai tujuanmu. tapi dari seberapa berkah proses menuju keberhasilan itu.
(*Setia Furqon Kholid*)

Berjuanglah, bersyukurlah dan bersabarlah dalam menghadapi hidup, karena hidup adalah ujian.
(*Irwin Ulil H*)

^{*}Departemen Agama Republik Indonesia. 2002. Mushaf Al Qur'an dan Terjemahannya. Jakarta : Al Huda

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan dibawah ini:

nama : Kun Rasyida

NIM : 102210101054

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Deteksi Kemurnian Air Zamzam Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrik” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 19 Juli 2014

Yang menyatakan,

(Kun Rasyida)

NIM. 102210101054

SKRIPSI

**DETEKSI KEMURNIAN AIR ZAMZAM MENGGUNAKAN METODE
SPEKTROFOTOMETRI *FOURIER TRANSFORM INFRARED* (FTIR) DAN
KEMOMETRIK**

Oleh
Kun Rasyida
NIM 102210101054

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Prof. Drs. Bambang Kuswandi, M.Sc., Ph.D.

Dosen Pembimbing Anggota : Nia Kristiningrum, S. Farm., Apt., M.Farm

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Deteksi Kemurnian Air Zamzam Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrik” telah diuji dan disahkan pada :

hari, tanggal : Jum’at, 19 Juli 2014

tempat : Fakultas Farmasi Universitas Jember

Tim Pembimbing:

Dosen Pembimbing Utama,

Dosen Pembimbing Anggota,

Prof. Drs. Bambang K., M.Sc., Ph.D.
NIP 196902011994031002

Nia Kristiningrum, S. Farm., Apt., M.Farm
NIP 198204062006042001

Tim Penguji :

Dosen Penguji I,

Dosen Penguji II,

Dian Agung P., S.Farm., M.Farm., Apt.
NIP 198410082008121004

Moch. Amrun H., S.Si., Apt., M.Farm.
NIP 197801262001121004

Mengesahkan
Dekan Fakultas Farmasi Universitas Jember

Lestyo Wulandari, S.Farm., Apt., M.Farm.
NIP 197604142002122001

RINGKASAN

Deteksi Kemurnian Air Zamzam Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrik; Kun Rasyida, 102210101054; 2014; 97 halaman; Fakultas Farmasi Universitas Jember.

Air zamzam merupakan air suci yang terletak di Mekah, tepatnya di dalam Masjidil Haram. Air zamzam dipercaya memiliki manfaat serta keistimewaan sehingga banyak dikonsumsi umat muslim di seluruh dunia. Sebuah penelitian menyatakan bahwa air zamzam memiliki bentuk kristal yang indah dan tidak ada satu pun jenis air yang menyerupai butiran-butiran kristal air zamzam. Sebelum adanya penelitian tersebut, Rasulullah SAW telah bersabda yaitu “Sebaik-baik air di muka bumi adalah air zamzam. Air tersebut bisa menjadi makanan yang mengenyangkan dan bisa sebagai obat penyakit”. Dengan berbagai keistimewaannya, air zamzam menjadi oleh-oleh wajib yang dibawa seseorang setelah melaksanakan ibadah haji atau umroh di Tanah Suci Mekah. Namun, sejak tahun 2010, keinginan untuk membawa air zamzam dalam jumlah yang banyak semakin sulit dilakukan. Pemerintah Arab Saudi menerapkan aturan ketat tentang pengiriman air zamzam ke luar negeri. Aturan pelarangan ekspor air zamzam menyebabkan peningkatan penjualan air zamzam palsu secara global. Peningkatan penjualan tersebut menyebabkan kekhawatiran di tengah-tengah konsumen terutama umat muslim. Maka dari itu perlu dikembangkan suatu metode yang bisa digunakan untuk menentukan kemurnian air zamzam. Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) yang dikombinasikan dengan metode statistik multivariat (kemometrik) dipilih karena merupakan metode yang mudah, cepat dan sederhana.

Penelitian dilakukan dalam empat tahap. Tahap pertama adalah pembuatan sampel air zamzam simulasi untuk *training set* dan *test set*. *Training set* dibuat dengan 11 macam konsentrasi yaitu air zamzam murni (konsentrasi 0% air mineral),

100% air mineral dan campuran air zamzam dengan air mineral dalam rentang konsentrasi 10%-100%. *Test set* dibuat dengan 6 macam konsentrasi yaitu satu air zamzam murni (konsentrasi 0% air mineral), 100% air mineral dan empat campuran air zamzam dengan air mineral dalam konsentrasi 10%, 20%, 50%, 80%. Tahap kedua adalah pengukuran dengan spektrofotometer FTIR yang menghasilkan pola spektrum sampel dimana spektrum yang dihasilkan digunakan untuk membentuk dan memilih model kalibrasi serta klasifikasi yang terbaik. Tahap ketiga adalah pembentukan dan pemilihan model kalibrasi (PLS) dan klasifikasi (LDA, SIMCA, SVM) kemometrik dengan *The Unscrambler X 10.2* kemudian dipilih model klasifikasi terbaik. Tahap keempat adalah pengaplikasian metode Spektrofotometri FTIR dan model yang terpilih terhadap sampel air zamzam yang beredar di Pasar Tanjung. Sampling air zamzam yang beredar dilakukan dengan teknik *total sampling*.

Pola spektrum inframerah air zamzam murni dan air zamzam campuran memiliki pola serapan yang mirip dan hanya berbeda pada nilai kuantitatif absorbansi. Untuk membedakan spektrum tersebut, digunakan model klasifikasi kemometrik berupa LDA terhadap empat set data dan model klasifikasi LDA terhadap set data 1 merupakan model klasifikasi kemometrik yang terbaik dengan kemampuan pengenalan sebesar 100% dan kemampuan prediksi sebesar 100%. Selain itu, model LDA lebih mudah dalam pengolahan data dibandingkan model SIMCA serta LDA dapat mendiskriminasikan dalam bentuk tabel prediksi maupun dalam bentuk pemetaan dibandingkan model SVM. Setelah dilakukan pengaplikasian terhadap sampel air zamzam diketahui bahwa keseluruhan sampel yang beredar di Pasar Tanjung adalah air zamzam campuran.

PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT, atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Deteksi Kemurnian Air Zamzam Menggunakan Metode Spektrofotometri *Fourier Transform Infrared* (FTIR) dan Kemometrik”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Fakultas Farmasi Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dekan Fakultas Farmasi Universitas Jember, Ibu Lestyo Wulandari, S.Si., Apt., M.Farm.
2. Bapak Prof. Drs. Bambang Kuswandi., M.Sc., Ph.D. selaku Dosen Pembimbing Utama dan Ibu Nia Kristiningrum, S. Farm., Apt., M.Farm, selaku Dosen Pembimbing Anggota yang penuh kesabaran memberi bimbingan, dorongan, meluangkan waktu, pikiran, perhatian dan saran kepada penulis selama penyusunan skripsi ini sehingga bisa terlaksana dengan baik
3. Bapak Dian Agung P.,S.Farm., M.Farm.,Apt., selaku Dosen Penguji I dan bapak Moch. Amrun Hidayat, S.Si., Apt., M.Farm. Dosen Penguji II, terima kasih atas saran dan kritiknya.
4. Dosen Pembimbing Akademik yang telah membimbing selama penulis menjadi mahasiswa
5. Seluruh Dosen Fakultas Farmasi Universitas Jember yang telah memberikan ilmu, bimbingan, saran dan kritik kepada penulis.
6. Orang tua dan keluarga penulis, Bapak, Mama, Mbak Eka dan Mbak Ari terimakasih atas dukungan, doa dan pengorbanannya selama ini,

7. Saudari tercinta kak Ros, Mbak Galuh, Nina, Tira, Irwin, Ulya, Dek Ika, Dek Riris, Dek Zila, Endah, Imas, Siska, Rini, Dani terimakasih atas keikhlasan dan cinta kasih yang diberikan selama ini.
8. Teman-teman skripsi kimia Irwin, Khrisna, Annisa, Mbak Tata, Vishnu, Nuha, Lely, Nindia, Wimala, Nisa' yang selalu siap memberi bantuan tenaga dan pikiran,
9. Teman-teman dan adik-adik UKKI Asy Syifa', UKM Karisma Fakultas Farmasi, UKM Pelita Universitas Jember, dan ADK Jember Raya yang telah berjuang bersama,
10. Teman-teman KKN Kelompok 57, Rosyid, Rido, Shobar, Andre, Endra, Nungky, Nita, Widya, dan Merta, terima kasih atas semangatnya.
11. Teman-teman Relawan Qur'an, Wirda, Iis, Mbak Faida, Mbak Tira, Pak Taufik, Pak Farid yang selalu memberikan motivasi dan hiburan disaat penulis mulai jenuh dalam menyelesaikan skripsi.
12. Keluarga Bapak Samsul dan Mas Imam Wahyudi, terimakasih atas bantuannya untuk memperoleh air zamzam murni.
13. Teknisi Laboratorium Kimia Farmasi Bu Wayan dan Mbak Hani yang telah membantu dan memberi masukan.
14. Rekan-rekan seperjuangan angkatan 2010 yang telah berjuang bersama-sama demi sebuah gelar Sarjana Farmasi dan akan selalu menjadi sebuah keluarga.
15. Seluruh civitas akademika dan semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu.

Hanya doa yang dapat penulis panjatkan semoga segala kebaikan dan dukungan yang diberikan kepada penulis mendapat balasan dari Tuhan. Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat bermanfaat.

Jember, Juli 2014
Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	i
HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iii
HALAMAN MOTO	iv
HALAMAN PERNYATAAN	v
HALAMAN PEMBIMBINGAN	vi
HALAMAN PENGESAHAN	vii
RINGKASAN	viii
PRAKATA	x
DAFTAR ISI	xii
DAFTAR TABEL	xv
DAFTAR GAMBAR	xvi
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
DAFTAR SINGKATAN	xix
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Manfaat	4
1.5 Batasan Masalah	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Air Zamzam	6
2.1.1 Sejarah Singkat Air Zamzam.....	6
2.1.2 Struktur Sumur Zamzam	7
2.1.3 Profil Mineral Air Zamzam	8

2.2 Perbedaan Air Zamzam dan Air Minum Biasa	9
2.2.1 Kation dan Anion Air Zamzam dan Air Minum Biasa	9
2.2.2 Profil Optik Air Zamzam dan Air Minum Biasa.....	10
2.3 Spektroskopi Inframerah atau <i>Infrared</i> (IR)	10
2.3.1 Spektroskopi IR Dispersif (Konvensional)	11
2.3.2 Spektrofotometer FTIR dan Aplikasinya	12
2.4 Analisis Kemometrik dengan <i>The Unscrambler</i>	15
2.4.1 <i>Principal Component Analysis</i> (PCA)	17
2.4.2 <i>Soft Independent Modelling of Class Analogies</i> (SIMCA)	18
2.4.3 <i>Partial Least Square</i> (PLS)	19
2.4.4 <i>Linear Discriminant Analysis</i> (LDA)	20
2.4.5 <i>Support Vector Machines</i> (SVM)	20
BAB 3. METODOLOGI	22
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	22
3.2 Bahan dan Alat	22
3.2.1 Bahan	22
3.2.2 Alat	22
3.3 Alur Penelitian	23
3.4 Prosedur Penelitian	23
3.4.1 Pembuatan Sampel Simulasi	23
3.4.2 Pengukuran Sampel dengan Spektrofotometer FTIR	25
3.4.3 Analisis Data Spektrum dengan Kemometrik (<i>The Unscrambler X 10.2</i>)	25
3.4.4 Aplikasi Sampel yang Beredar Di Pasaran	26
a. Sampling	26
b. Deteksi Kemurnian Air Zamzam Menggunakan Spektrofotometri FTIR dan Kemometrik.....	26

c. Pengukuran Bobot Jenis Air Zamzam Murni dan Sampel	
Air Zamzam	26
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	28
4.1 Pembuatan Sampel Simulasi	28
4.1.1 <i>Training Set</i>	28
4.1.2 <i>Test Set</i>	29
4.2 Karakteristik Spektrum Inframerah	30
4.2.1 Spektrum Air	30
4.2.2 <i>Training Set</i>	31
4.2.3 <i>Test Set</i>	32
4.3 Pembentukan dan Pemilihan Model Klasifikasi	32
4.3.1 Pembentukan Model Kalibrasi dan Klasifikasi pada <i>Training</i>	
<i>Set</i>	33
4.3.2 Evaluasi Model Kalibrasi dan Klasifikasi dengan <i>Test Set</i>	35
4.3.3 Pemilihan Model Kalibrasi dan Klasifikasi Terbaik	38
4.4 Aplikasi pada Sampel Air Zamzam yang Beredar Di Pasaran	39
4.4.1 Sampling	39
4.4.2 Deteksi Kemurnian Sampel Air Zamzam Menggunakan	
Spektrometri FTIR dan Kemometrik	40
4.4.3 Pengukuran Bobot Jenis Air Zamzam Murni dan Sampel Air	
Zamzam	41
BAB 5. PENUTUP	43
5.1 Kesimpulan	43
5.2 Saran	43
DAFTAR PUSTAKA	44
LAMPIRAN	49

DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Perbandingan air zamzam, air minum kemasan, dan air suling	9
2.2 Sifat optik air zamzam dibandingkan dengan air kemasan	10
2.3 Daftar pita absorpsi IR pada komponen mayor makanan	11
3.1 Komposisi dan kategori air mineral biasa dan air zamzam (dari total air 10 ml) untuk <i>training set</i>	24
3.2 Penamaan set data	25
4.1 Komposisi dan kategori air mineral dan air zamzam (dari total air 10 ml) untuk <i>training set</i>	29
4.2 Komposisi dan kategori air mineral dan air zamzam (dari total air 10 ml) untuk <i>test set</i>	29
4.3 Hasil klasifikasi model LDA, SIMCA dan SVM terhadap <i>test set</i>	37
4.4 Perbandingan nilai <i>R-Square</i> dan nilai <i>RMSE training set</i> serta nilai <i>R-Square</i> dan nilai <i>RMSE test set</i>	38
4.5 Nilai kemampuan pengenalan dan prediksi model klasifikasi LDA, SIMCA dan SVM	39
4.6 Daftar merek air zamzam yang beredar di beberapa toko di Pasar Tanjung	40
4.7 Prediksi LDA terhadap sampel yang beredar di pasaran	41
4.8 Hasil pengukuran berat jenis air dengan menggunakan piknometer	42

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Lokasi sumur zamzam	6
2.2 Bentuk dan dimensi sumur zamzam.....	7
2.3 Pompa listrik (<i>electric submersible pump</i>).....	8
2.4 Komponen dasar dari spektrofotometer FTIR.....	13
2.5 Skema interferometer FTIR.....	13
2.6 Prinsip ATR.....	15
2.7 Bagan proses kemometrik	16
2.8 Prinsip PCA	18
2.9 Prinsip SVM	21
3.1 Bagan alur penelitian	23
4.1 Spektrum air zamzam; air kran; air bidestilata (tanpa mineral); air mineral.....	30
4.2 Spektrum IR <i>training set</i>	31
4.3 Spektrum IR <i>test set</i>	32
4.4 Model PLS dari <i>training set</i> untuk set data 1	33
4.5 Pemetaan model LDA untuk set data 1	35
4.6 Pemetaan model SIMCA untuk set data 1	35
4.7 PLS <i>test set</i> untuk set data1	36
4.8 Hasil PLS sampel terhadap model.....	41

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
A. ALAT DAN BAHAN YANG DIGUNAKAN	49
A.1 Sampel <i>Training Set</i> dan <i>Test Set</i>.....	49
A.2 Spektrofotometer FTIR.....	49
A.3 Sampel dari Pasaran.....	49
B. DATA SPEKTRUM INFRAMERAH YANG DIHASILKAN.....	50
B.1 Set Data 1 (Spektrum Utuh dan tanpa Perlakuan Pendahuluan)	50
B.2 Set Data 2 (Spektrum Daerah 1800-600 cm⁻¹ dan tanpa Perlakuan Pendahuluan).....	51
B.3 Set Data 3 (Spektrum Utuh dan dengan Perlakuan Pendahuluan)...	52
B.4 Set Data 4 (Spektrum Daerah 1800-400 cm⁻¹ dan dengan Perlakuan Pendahuluan).....	53
C. DATA KEMOMETRIK DAN PERHITUNGAN KEMAMPUAN PENGENALAN	54
C.1 Set Data 1	54
C.1.1 Model PLS	54
C.1.2 Model LDA.....	55
C.1.3 Model SIMCA	56
C.1.4 Model SVM	57
C.2 Set Data 2.....	59
C.2.1 Model PLS	59
C.2.2 Model LDA.....	60
C.2.3 Model SIMCA	61
C.2.4 Model SVM	62
C.3 Set Data 3	63
C.3.1 Model PLS	63

C.3.2 Model LDA.....	64
C.3.3 Model SIMCA	65
C.3.4 Model SVM.....	66
C.4 Set Data 4	68
C.4.1 Model PLS	68
C.4.2 Model LDA.....	69
C.4.3 Model SIMCA	70
C.4.4 Model SVM.....	71
D. APLIKASI PADA SAMPEL YANG BEREDAR DI PASARAN.....	72
D.1 Data Spektrum Utuh Inframerah dan Tanpa Pendahuluan	72
D.2 Prediksi Kategori Menggunakan Model LDA	73
D.3 Prediksi Kategori Menggunakan Model PLS.....	73
E. PERHITUNGAN BERAT JENIS AIR DENGAN PIKNOMETER.....	74
E.1 Hasil Penimbangan	74
E.2 Hasil Perhitungan.....	74
E.3 Hasil Uji Statistik	75

DAFTAR SINGKATAN

ATR	: <i>Attenuated Total Reflectance</i>
FTIR	: <i>Fourier Transform Infrared</i>
LDA	: <i>Linear Discriminant Analysis</i>
PC	: <i>Principal Component</i>
PCA	: <i>Principal Component Analysis</i>
PLS	: <i>Partial Least Square</i>
SIMCA	: <i>Soft Independent Modelling of Class Analogies</i>
SVM	: <i>Support Vector Machine</i>
RMSE	: <i>Root Mean Square Error</i>